複素固有値問題に基づく非平衡統計力学理論 : 複素スペクトル理論

AUTHOR(S):

田崎, 秀一

CITATION:

田崎, 秀一. 複素固有値問題に基づく非平衡統計力学理論 : 複素スペクトル理論. 物性研究 1993, 60(1): 1-19

ISSUE DATE:

1993-04-20

URL:

http://hdl.handle.net/2433/95097

物性研究　60－1（1993－4）

複素固有値問題に基づく非平衡統計力学理論*
－複素スペクトル理論－

ソルベイ物理・化学研究所　田崎　秀一

（1993年4月5日受理）

1．序

ここでは、I. Prigogine を中心とするブラッセル及びテキサスのグループにより提案されている非平衡統計力学理論[1–20 及びその引用文献]について最近の発展を中心に紹介、解説する。この理論は、従来 Subdynamics 理論[21–27 及びその引用文献] と呼ばれていたもので、複素スペクトル理論とも呼ばれる。

非平衡統計力学の目的は、大きく分けて、a) 輸送係数等の不可逆な時間変化を特徴付けるマクロな量をミクロな力学から導くこと、b) マクロなレベルで観測される不可逆変化がミクロな可逆な力学からどのように生じるかを説明することである。周知のように輸送係数の導出に関しては、久保の線型応答の理論[28]を始め、様々な方法が提案され、広く用いられている[例えば 29]。また、可逆な力学からマクロなレベルでの不可逆性が生じる原因は通常、相空間の粗視化に帰されている[例えば 30]。しかし、この見方は、ミクロとマクロなスケールを分ける一定のサイズを必要とするため人為的であると考えられ、また近年のメゾスコピックな系の研究からも再考の必要が生じるであろう。

マクロなサイズの系を記述する際には、純力学的描像あるいは、統計的描像の一方をとることができる。純力学的描像では、系のサイズの大小にかかわらず、各時刻における系の状態は、純粋な力学状態にあると考えられ、統計的状態は、改善可能な情報の不完全さに伴ってのみ現れると考える。この描像では、統計集団による平衡状態の記述の正当性は、系のエルゴード性、つまり、「一つの軌道にわたる長時間平均が、（マクロな束縛と矛盾しない）相空間内の部分集合上に一様分布する確率密度にわたる相空間平均と一致する。」という性質により保証される。従って、与えられた系が、平衡から大きく離れた状態にあると、少なくとも系が局所平衡に達するまでは、統計集団による記述は意味を持たないことになる。これに対し、統計的描像では、「物理的状態は、それが熱平衡であるか否かにかかわらず、一般に状態密度関数（古典力学）あるいは、密度行列（量子力学）によって確率的に表される」ことを仮定する。これは、現実の実験に有限の精度が伴うことから考えると充分自然な描像である。また、純粋な力学状態、即ち、相空間の一点や波動関数も、密度関数/密度行列によって表されるので、この仮定は、数学的に制限を加えていることにはならない。

複素スペクトル理論では、統計的描像に従い、密度関数/密度行列の時間発展を調べることが中心となる。この理論では、不安定状態の寿命、相関関数の減衰率等の不可逆変化を特徴付ける量が、密度関数/密度行列の時間発展演算子の複素固有値として、ミクロな力学から直接計算される。以下では、主として複素スペクトル理論の技術的な面に焦点を当て、その方法、数学的構造、その物理的意味について論じ、ミクロな可逆性と

* 本稿は、編集部の方から特にお願いして執筆していただいた原稿である。

熱力学の第二法則が表すマクロな不可逆性の関係については、結語において可能なシナリオを示すにとどめる。第2節では、通常の非平衡統計力学に現れるマスター方程式から、Liouville 演算子の複素固有値が自然に現れることを示し、第3節では複素スペクトル理論の方法を説明する。第4節では、rigged Hilbert 空間（Gelfand の3つ組）による、数学的裏付けとその物理的解釈を論じる。

2. マスター方程式から Subdynamics へ

系の巨視的自由度のような部分的自由度の運動は、散逸的なマスター方程式により記述できる。Subdynamics 理論ではマスター方程式のもつ散逸的時間発展が直接、全系の Liouville 演算子と関係付けられる。この節では、文献[23, 24] に従って Subdynamics 理論を、一般化されたマスター方程式の理論から導く。

状態密度関数（古典力学）あるいは密度行列（量子力学）ρ の時間発展は、孤立系では Liouville-von Neumann 方程式により記述される。

$$i\frac{\partial\rho}{\partial t} = L\rho \tag{2.1}$$

ここで L は Liouville 演算子で、Hamiltonian H との Poisson 括弧式（古典力学）又は交換子（量子力学）である。

$$L\rho = \begin{pmatrix} i\{H,\rho\} & \text{（古典力学）} \\ [H,\rho] & \text{（量子力学）} \end{pmatrix} \tag{2.2}$$

密度関数/密度行列の集合は、通常のスカラー倍、和に関し閉じており、次式の内積を持つ Hilbert 空間を成す。

$$<\rho\mid\rho'>\equiv \begin{pmatrix} \int dpdq \quad \rho*(p,q) \quad \rho'(p,q) & \text{（古典力学）} \\ \mathrm{tr}(\rho^\dagger\rho') & \text{（量子力学）} \end{pmatrix} \tag{2.3}$$

ここで p,q は正準座標で、$*$ は複素共役を、$\dagger$ はエルミート共役を表す。Liouville 演算子はこの Hilbert 空間に作用する Hermite 演算子である。以下、必要に応じて Dirac のブラ・ケット記法を用いる。

統計力学で扱われる多くの系では、部分的な自由度のふるまいだけに注目すれば良い。部分的な自由度の状態は全系の密度関数/ 密度行列ρ の成分により記述され、ρ に作用する射影演算子 P により$\rho_0\equiv P\rho$ と表される。Liouville-von Neumann 方程式 (2.1) より、ρ_0 に関する次の運動方程式が得られる[23, 29, 31, 32]。

$$i\frac{\partial\rho_0(t)}{\partial t} = PLP\rho_0(t) - i\int_0^t dt' PLQe^{-iQLQ(t-t')}QLP\rho_0(t') + PLQe^{-iQLQt}\hat{\rho}(0) \tag{2.4}$$

ここで $Q=I-P$ は P に直交する射影演算子（I は恒等演算子）で、$\hat{\rho}(0)\equiv Q\rho(0)$ は注目していない自由度に対応するρ の成分である。また初期時刻は $t=0$ とした。方程式 (2.4) は、一般化されたマスター方程式とも呼ばれる。

(2.4) 式を$\hat{\rho}(0) = 0$という初期条件の下で Laplace-Fourier 変換によって解くと次式が得られる。

$$\rho_0(t) = \frac{i}{2\pi}\int_{-\infty+i0}^{\infty+i0} dz \frac{e^{-iZt}}{z - \hat{\psi}(z)}\rho_0(0) \tag{2.5}$$

ここで演算子$\hat{\psi}(z)$ は collision operator と呼ばれ次式で与えられる。

$$\hat{\psi}(z) = PLP + PLQ\frac{1}{z - QLQ}QLP \tag{2.6}$$

(2.5) で$\pm\infty + i0$は、実軸のすぐ上の積分路をとることを示す。解 (2.5) のふるまいは、演算子$1/(z-\hat{\psi}(z))$ のzに関する特異点により完全に定められる。以下簡単のため、注目する自由度を取り出す射影演算子 P が $N \times N$ 行列であると仮定する。すると、各パラメーターzに対し演算子$\hat{\psi}(z)$ は N 個の固有値$\eta_\alpha(z)$ を持ち、演算子 $1/(z - \hat{\psi}(z))$ の特異点は関数 $1/(z - \eta_\alpha(z))$ の特異点と一致する。ここでは、$\eta_\alpha(z)$ に縮退はなく、$1/(z - \eta_\alpha(z))$ が下半平面で、$z = z_\alpha$ という一位の極を除き解析的であると仮定する。$\hat{\psi}(z)$ は Hermite 演算子ではないので、固有値$\eta_\alpha(z)$ に対し左右の固有ベクトル $v_\alpha(z), u_\alpha(z)$ を持ち、それらは射影演算子 P の指定する部分空間で完全双対基底を成す[24]。

$$\hat{\psi}(z) \mid u_\alpha(z)\rangle = \eta_\alpha(z) \mid u_\alpha(z)\rangle \tag{2.7a}$$

$$\langle v_\alpha(z) \mid \hat{\psi}(z) = \eta_\alpha(z)\langle v_\alpha(z) \mid \tag{2.7b}$$

$$\langle v_\alpha(z) \mid u_\beta(z)\rangle = \delta_{\alpha\beta} \tag{2.7c}$$

$$\sum_{\alpha=1}^{N} \mid u_\alpha(z)\rangle\langle v_\alpha(z) \mid = P \tag{2.7d}$$

(2.5)で、(2.7) を用い積分路を下半平面に閉じると

$$\begin{aligned}\rho_0(t) &= \frac{i}{2\pi}\sum_{\alpha=1}^{N}\int_{-\infty+i0}^{\infty+i0} dz \mid u_\alpha(z)\rangle \frac{e^{-izt}}{z - \eta_\alpha(z)}\langle v_\alpha(z) \mid \rho_0(0)\rangle \\ &= \sum_{\alpha=1}^{N} \mid u_\alpha(z_\alpha)\rangle \frac{e^{-iz_\alpha t}}{1 - \eta'_\alpha(z_\alpha)}\langle v_\alpha(z_\alpha) \mid \rho_0(0)\rangle\end{aligned} \tag{2.8}$$

ここでη'_αはη_α のzについての微分である。(2.8) は情報が注目している自由度から残りの自由度に流れ出すことに対応し、一般には減衰する。つまり $\mathrm{Im} z_\alpha \leqq 0$ である。ベクトル $u_\alpha(z_\alpha)$ と $v_\beta(z_\beta)$ は異なる z の値に対応しているので直交していないことに注意しておく。

(2.8) は部分系の時間発展を記述しているので、複素振動数 z_αが含まれることに矛盾はない。Subdynamics 理論では、この複素振動数が密度関数/密度行列の空間で Hermite である Liouville 演算子 L の複素固有値として特徴付けられる。ここでは形式的議論のみを与え、数学的意味付けについては、第4節で扱う。

まず、Liouville 演算子の resolvent の恒等式[23,24,33]

$$R(z) \equiv \frac{1}{z-L} = \left\{P + \frac{1}{z-QLQ}QLP\right\}\frac{1}{z-\hat{\psi}(z)}\left\{P + PLQ\frac{1}{z-QLQ}\right\} + Q\frac{1}{z-QLQ} \tag{2.9}$$

に注目する。これは、resolvent $R(z)$ の特異点が、QLQ の固有値と演算子 $1/(z-\hat{\psi}(z))$ の特異点から成ることを示している。一般にこの両者は分離している。なぜなら、QLQ の固有値をζとすると、$z=\zeta$ で $\hat{\psi}(z)$ は発散し（(2.6) 式参照)、$1/(z-\hat{\psi}(z))$ の特異点とはなり得ないからである。次に (2.9) を用いて、$1/(z-\hat{\psi}(z))$ の特異点のみの寄与を表す射影演算子Π 、そして、全系の Liouville 演算子 L と部分系の複素振動数 z_α をつなぐ演算子 Cが導入される。演算子Π は次式により与えられる。

$$\begin{aligned}\Pi &\equiv \frac{i}{2\pi}\oint_\Gamma dz\frac{1}{z-L} \\ &= \sum_{\alpha=1}^{N}\left\{P + \frac{1}{z_\alpha - QLQ}QLP\right\} \mid u_\alpha(z_\alpha)\rangle\frac{1}{1-\eta'_\alpha(z_\alpha)}\langle v_\alpha(z_\alpha)\mid \left\{P + PLQ\frac{1}{z_\alpha - QLQ}\right\}\end{aligned} \tag{2.10}$$

ここで積分路Γ は、$z_\alpha(\alpha = 1\cdots N)$ を内部に含み、QLQ の固有値を含まない時計回りの曲線である。$v_\alpha(z), u_\alpha(z)$ が $z-\hat{\psi}(z)$ の固有値 $z-\eta_\alpha(z)$ に対する左右の固有ベクトルであることから、Π が L と可換な射影演算子であることが示せる（但し、(2.10) から解るように Hermite ではない)。

$$\Pi^2 = \Pi \quad , \quad \Pi L = L\Pi \tag{2.11}$$

ベクトル $u_\alpha(z_\alpha)$ の双対基底$\tilde{u}_\alpha$, つまり

$$\langle \tilde{u}_\alpha \mid u_\beta(z_\beta)\rangle = \delta_{\alpha\beta} \quad , \quad \sum_{\alpha=1}^{N} \mid u_\alpha(z_\alpha)\rangle\langle\tilde{u}_\alpha \mid = P \tag{2.12}$$

を満たすベクトル$\tilde{u}_\alpha$ を用い演算子 C を次のようにおく。

$$C \equiv \sum_{\alpha=1}^{N}\frac{1}{z_\alpha - QLQ} \mid u_\alpha(z_\alpha)\rangle\langle\tilde{u}_\alpha \mid \tag{2.13}$$

すると、次の関係式が得られる。

$$L(P+C) = (P+C)\Theta \tag{2.14a}$$

$$\Pi = (P+C)P\Pi \tag{2.14b}$$

ここでΘ は、部分系の複素振動数z_α を固有値に、$u_\alpha(z_\alpha), \tilde{u}_\alpha$ を右左の固有ベクトルに持つ散逸的演算子である。

$$\Theta \equiv \sum_{\alpha=1}^{N} | u_\alpha(z_\alpha)\rangle z_\alpha \langle \tilde{u}_\alpha | \tag{2.15}$$

(2.14a) 式は、演算子$P+C$ が、マスター方程式の時間発展を特徴付ける複素振動数z_α と Liouville 演算子L を関係付けていることを示している。事実、Θ の右固有ベクトル$u_\alpha(z_\alpha)$ は、$P+C$ によりL の固有値z_α に対する右固有ベクトルに写される。

$$L(P+C) | u_\alpha(z_\alpha)\rangle = (P+C)\Theta | u_\alpha(z_\alpha)\rangle = z_\alpha(P+C) | u_\alpha(z_\alpha)\rangle \tag{2.16}$$

また、(2.14b) から、$\hat{\Pi} \equiv I - \Pi$ と置く時、密度関数/ 密度行列ρ の時間発展が

$$\rho(t) = e^{-iLt}\rho(0) = (P+C)e^{-i\Theta t}P\Pi\rho(0) + \hat{\Pi}e^{-iLt}\rho(0) \tag{2.17}$$

と表されることが解る。右辺第一項の散逸的な時間発展が、Liouville 演算子による時間発展から得られるのである。この散逸的な時間発展は Subdynamics と呼ばれている[22,23]。つまり、Subdynamics 理論では、マスター方程式の不可逆な時間発展を特徴付ける複素振動数が、直接 Liouville 演算子の固有値として現れる。マスター方程式により様々な輸送現象を取り扱うことができるので[32]、結局、輸送係数等は Liouville 演算子の複素固有値から導かれることになる。この結果は、しかし、Hilbert 空間上で Hermite な Liouville 演算子が複素固有値を持つという事実を含んでいる。この点を理解するには、形式論だけでは不十分であり、第4節で議論するように数学的構造を調べる必要がある。尚、一般の Hamiltonian 系では、マスター方程式の解 (2.5) に現れる演算子$1/(z-\hat{\psi}(z))$ は、下半平面の極に加え、実軸上にカットを持つ。この場合には、(2.5) の積分路を閉じることができなくなるため、(2.8) に余分な項が現れるが、(2.9) 式以下の議論はそのまま成立する。

3. 複素スペクトル理論

前節で見たように、Subdynamics 理論では、一般化されたマスター方程式の散逸的な時間発展を特徴付ける複素振動数が、全系の Liouville 方程式の複素固有値として現れる。[25]では、マスター方程式で注目していなかった自由度に関する部分空間をさらに分割することにより、Liouville 演算子を一組の散逸的演算子によって特徴付けできることが示された。この理論は[2] により簡略化され、[3]により Liouville演算子の複素固有値に対応するスペクトル分解を与えることが示された ([27]で既にこのスペクトル分解は得られているが、その点は強調されていない)。ここでは、[11]に沿って、まず、一セットの射影演算子 $\{\Pi_n\}$ と散逸的演算子 $\{\theta_n\}$ から Liouville 演算子の複素スペクトル分解が構成できることを示し、次に、これらの演算子の構成法を説明し、最後に、例として Friedrichs のモデル[12 − 14, 34 − 36]を取り上げる。この節では、

Hamiltonian 系を扱い、Liouville 演算子 L が、非摂動部分 L_0 と摂動 λL_V (λ は結合定数) の和であると仮定する。

$$L = L_0 + \lambda L_V \tag{3.1}$$

3-1. Liouville 演算子の複素スペクトル分解

この項では、L の複素スペクトル分解の構成の概要を説明する。複素スペクトル理論は、摂動論的アプローチに基づいており、非摂動 Liouville 演算子 L_0 のスペクトル分解から出発する。次項で説明するように L_0 の固有空間は、ある同値関係により可算個の類に分類される。これは、L_0 と可換で互いに直交する射影演算子の完全系 $\{P_n\}$ $(n = 0, 1, \cdots)$ を導入することと等価である。

$$L_0 P_n = P_n L_0 \tag{3.2a}$$

$$P_n P_m = \delta_{nm} P_n \tag{3.2b}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_n = I \tag{3.2c}$$

ここでδ_{nm} は Kronecker のデルタである。各射影演算子 P_n に対し、摂動的方法で、前節で扱った射影演算子Π と同様の射影演算子Π_n が作られる (次項参照)。これは Liouville 演算子 L と交換し、1 の分解を与える。

$$L\Pi_n = \Pi_n L \tag{3.3a}$$

$$\Pi_n \Pi_m = \delta_{nm} \Pi_n \tag{3.3b}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \Pi_n = I \tag{3.3c}$$

各射影演算子Π_n に対し、前節の補助的演算子 C と同様の演算子 C_n 、散逸的演算子Θ と同様のθ_n が存在し、次式が成立する (次項参照)。

$$L(P_n + C_n) = (P_n + C_n)\theta_n \tag{3.4a}$$

$$\Pi_n = (P_n + C_n) P_n \Pi_n \tag{3.4b}$$

θ_n のスペクトル分解が解ると (3.3), (3.4) から Liouville 演算子 L のスペクトル分解が得られる。一般的証明はないが、今まで調べられているモデルでは、次項の方法で構成されたθ_n のスペクトルが、実数または

負の虚数部分を持つ複素数となることが解っている。このような場合、θ_n は次のスペクトル分解を持つ。

$$\theta_n = \sum\!\!\!\!\!\!\!\int_\alpha \mid u_{\alpha n}\rangle z_{\alpha n} \langle \tilde{u}_{\alpha n} \mid \tag{3.5}$$

ここで、$\sum\!\!\!\!\!\!\int_\alpha$は、パラメータ$\alpha$ に関する和または積分を表し、$z_{\alpha n}(\mathrm{Im} z_{\alpha n} \leqq 0)$ は、θ_n のスペクトル値、$u_{\alpha n}, \tilde{u}_{\alpha n}$ は対応する右左の固有ベクトルで、P_n の定める部分空間で完全直交双対基底を成す。

$$\theta_n \mid u_{\alpha n}\rangle = z_{\alpha n} \mid u_{\alpha n}\rangle, \quad \langle \tilde{u}_{\alpha n} \mid \theta_n = z_{\alpha n} \langle \tilde{u}_{\alpha n} \mid \tag{3.6a}$$

$$\langle \tilde{u}_{\alpha n} \mid u_{\beta n}\rangle = \bar{\delta}_{\alpha\beta} \tag{3.6b}$$

$$\sum\!\!\!\!\!\!\!\int_\alpha \mid u_{\alpha n}\rangle \langle \tilde{u}_{\alpha n} \mid = P_n \tag{3.6c}$$

(3.6b) で、$\bar{\delta}_{\alpha\beta}$ はα, β が離散的変数か連続変数かに応じて Kronecker のデルタあるいは Dirac のデルタ関数を表す。θ_n が対角化不可能な場合もおこり得る[11,19] がここでは論じない。

Liouville の演算子 Lのスペクトル分解は、(3.3) − (3.6) から直ちに導かれる。

$$\begin{aligned} L &= \sum_{n=0}^{\infty} L\Pi_n = \sum_{n=0}^{\infty} L(P_n + C_n)P_n\Pi_n = \sum_{n=0}^{\infty}(P_n + C_n)\theta_n P_n \Pi_n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum\!\!\!\!\!\!\!\int_\alpha (P_n + C_n) \mid u_{\alpha n}\rangle z_{\alpha n} \langle \tilde{u}_{\alpha n} \mid P_n \Pi_n = \sum_{n=0}^{\infty} \sum\!\!\!\!\!\!\!\int_\alpha \mid F_{\alpha n}\rangle z_{\alpha n} \langle \tilde{F}_{\alpha n} \mid \end{aligned} \tag{3.7}$$

ここで、$\mid F_{\alpha n}\rangle \equiv (P_n + C_n) \mid u_{\alpha n}\rangle$ は、L の右固有ベクトル、$\langle \tilde{F}_{\alpha n} \mid \equiv \langle \tilde{u}_{\alpha n} \mid P_n \Pi_n$ は、L の左固有ベクトルで、対応する固有値は $z_{\alpha n}$ である。さらに、(3.3b−c), (3.6b−c) から左右の固有ベクトルが、完全双対基底を成すことが示せる。

$$\langle \tilde{F}_{\alpha n} \mid F_{\beta m}\rangle = \delta_{nm}\bar{\delta}_{\alpha\beta}, \quad \sum_{n=0}^{\infty} \int \mid F_{\alpha n}\rangle \langle \tilde{F}_{\alpha n} \mid = I. \tag{3.8}$$

(3.7)式は、Liouville演算子 Lがその複素固有値 $z_{\alpha n}$ によって完全に特徴付けられることを示している。これに対応して密度関数/密度行列ρ の時間発展は散逸的運動の重ね合わせとなる。

$$\rho(t) = e^{-iLt}\rho(0) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum\!\!\!\!\!\!\!\int_\alpha F_{\alpha n} e^{-iz_{\alpha n}t} \langle \tilde{F}_{\alpha n} \mid \rho(0)\rangle \tag{3.9}$$

与えられた系に対し、(3.7), (3.9)を求めることが、複素スペクトル理論の主な目的である。スペクトル分解 (3.7) は、そこに含まれる複素固有値 $z_{\alpha n}$ が、直接、散逸的変化を特徴付けるマクロな量（不安定状態の寿

命、相関関数の減衰率、拡散定数 etc）と関係しているため、ミクロな力学からマクロな現象論的量を計算する方法を与える。また、時刻 t での密度関数/密度行列$\rho(t)$ の固有ベクトル展開 (3.9) は、散逸的時間変化の重ね合わせであるという点で、現象論に現れる固有関数展開（例えば、拡散方程式の解の Fourier 展開）と同様であり、ミクロな力学とマクロな現象論のより直接的関係を表している。

3-2. 射影演算子Π_n 、散逸的演算子θ_n の計算

非摂動 Liouville 演算子 L_0 の通常のスペクトル分解が与えられているものとし、Π_n とθ_n の計算法を説明する。L_0 は、密度関数/密度行列の Hilbert 空間で Hermite なので、固有ベクトルの完全直交系 g_ν と対応する実固有値ω_νによる次のスペクトル分解を持つ。

$$L_0 = \sum\!\!\!\!\!\!\int \mid g_\nu\rangle\omega_\nu\langle g_\nu \mid \tag{3.10}$$

Π_n, θ_n は次の手順に従って作られる。

1) 非摂動射影演算子 $\{P_n\}$ の導入

L_0 と可換な適当な射影演算子 P_0 を定める。与えられた系に対し P_0 は物理的考察に基づいて定められる（例えば、密度行列の対角要素への射影、密度関数の位置座標に依らない成分への射影 etc）。L_0 の各固有ベクトル g_ν に “degree”d_ν を g_ν を P_0 をつなぐ最小の L_V のべきとして定義する。

$$P_0 L_V^m \mid g_\nu\rangle \begin{pmatrix} = & 0 & (m < d_\nu) \\ \neq & 0 & (m = d_\nu) \end{pmatrix} \tag{3.11}$$

d_ν は非負整数で各固有ベクトル g_ν に対し一義的に定まる。$d_\nu = n$ である固有ベクトルの張る部分空間への射影演算子を P_n とおく。

$$P_n = \sum_{\nu:d_\nu=n} \mid g_\nu\rangle\langle g_\nu \mid \tag{3.12}$$

$d_\nu = +\infty$ という固有ベクトルが存在することもあるが、これは、$\{P_n\}$　$(n < +\infty)$ の定める部分空間の運動と全く独立に運動する。従って、P_∞ の定める空間を除いたものを密度関数/密度行列の空間と考え直すことにより、$d_\nu = +\infty$ を除くことができる。このように定めた射影演算子 $P_n(0 \leqq n < +\infty)$ は、関係式 (3.2a) − (3.2c) を満たす。

2) 補助的演算子 C_n, D_n の構成

射影演算子Π_n 、散逸的演算子θ_nは、以下の方程式の解として定められる補助的演算子 C_n, D_n から作られる。

$$C_n = Q_n C_n = C_n P_n \tag{3.13a}$$

$$P_m C_n = i\lambda \int_0^{\pm\infty} dt e^{-iL_0 t}(P_m C_n - P_m)L_V(P_n + C_n)e^{iL_0 t} \quad (m \gtrless n) \tag{3.13b}$$

$$D_n = D_n Q_n = P_n D_n \tag{3.14a}$$

$$D_n P_m = i\lambda \int_0^{\pm\infty} dt e^{-iL_0 t}(P_n + D_n)L_V(P_m - D_n P_m)e^{-iL_0 t} \quad (n \gtrless m) \tag{3.14b}$$

ここで、$Q_n \equiv I - P_n$で、積分の上限の複号と右端の複不等号は同じ順序に読む。これらより、0 でない C_n, D_n の行列要素が次式を満たすことが解る。

$$\langle g_\mu \mid C_n \mid g_\nu \rangle = \frac{\lambda}{\omega_\mu - \omega_\nu + i\epsilon_{\mu\nu}} \langle g_\mu \mid (C_n - Q_n)L_V(P_n + C_n) \mid g_\nu \rangle \tag{3.13$'$}$$

$$\langle g_\nu \mid D_n \mid g_\mu \rangle = \frac{\lambda}{\omega_\nu - \omega_\mu + i\epsilon_{\nu\mu}} \langle g_\nu \mid (P_n + D_n)L_v(Q_n - D_n) \mid g_\mu \rangle \tag{3.14$'$}$$

$$\epsilon_{\mu\nu} = \begin{cases} -\epsilon & (d_\mu \rangle d_\nu \text{ のとき}) \\ +\epsilon & (d_\mu \langle d_\nu \text{ のとき}) \end{cases} \tag{3.15}$$

ここで、εは正の無限小で、必ず $d_\nu = n$ である。(3.13),(3.14)（あるいは $(3.13'), (3.14')$ ）は、結合定数 λ についての形式的級数解を与える。その収束は、次節で論じる数学的構造に基づいて系ごとに吟味される。尚、L_0 の固有値に共鳴（縮退）がない時 $(3.13' - 14')$ は通常の摂動論に帰着する。

$(3.13'), (3.14')$ 式から解るように摂動級数は L_0 のいくつかの固有値が共鳴（縮退）している、あるいは共鳴に近い意味を失う。分母に無限小の純虚数を加える操作は共鳴分母を超関数と見なすことに相当し、共鳴分母に現れる L_0 の固有値ω_ν の一方が連続スペクトルでないと意味を持たない。このような系、つまり、連続スペクトルを持ち、共鳴が必ず連続スペクトルを伴って現れる系は Large Poincaré 系と名付けられている[1−14]。$(3.13'), (3.14')$ での分母の処理を行列要素に応じて決める方法は[25]によって導入された。$-i\varepsilon$ を加えることは遅延 Green 関数に相当する境界条件を採ることに、$+i\varepsilon$ を加えることは先進 Green 関数に相当する境界条件を採ることに当たっており、(3.15) の規則は “degree” の小さい状態から大きい状態に情報が流れていくという物理的描像に対応している。

3) Π_n, θ_n の構成

2) で求めた C_n, D_n を用い、Π_n を次式で定義する。

$$\Pi_n \equiv (P_n + C_n)P_n(I + D_n C_n)^{-1}(P_n + D_n) \tag{3.16}$$

すると C_n, D_n の方程式 (3.13), (3.14) より、Π_n が L と可換で1の分解を与え、互いに直交する射影演算子となる、即ち、性質 (3.3) をすべて満たすことが示せる[11]。さらに、

$$L(P_n + C_n) = (P_n + C_n)\theta_n \tag{3.17a}$$

$$\theta_n = P_n L(P_n + C_n) \tag{3.17b}$$

が成立する。実際、$L\Pi_n = \Pi_n L$ より

$$L(P_n + C_n)P_n\Pi_n = L\Pi_n = \Pi_n L$$
$$= (P_n + C_n)P_n\Pi_n L = (P_n + C_n)P_n L\Pi_n$$

$P_n + D_n C_n$ を右からかけると (3.17) が得られる。(3.13), (3.14) に現れる境界条件のため、(3.17b) の θ_n は一般には虚部を持ち、散逸的演算子となる。

3-3. Friedrichs のモデル

C_n 及びθ_n の構成法を、よく知られた Friedrichs のモデル[12 − 14, 34 − 36]を用いて例示する。この場合、前項方法は、Hilbert 空間のレベルで適用できる。Friedrichs のモデルでは、エネルギーω_1 をもつ離算的状態 $\mid 1\rangle$ がエネルギーω_k をもつ連続状態 $\mid k\rangle$ と相互作用し、前者は後者に埋めこまれている（例えば、$\omega_k \geq 0, \omega_1 > 0$）。その Hamiltonian は次式で与えられる。

$$H = \omega_1 \mid 1\rangle\langle 1 \mid + \int dk\omega_k \mid k\rangle\langle k \mid + \lambda \int dk V_k \{\mid 1\rangle\langle k \mid + \mid k\rangle\langle 1 \mid\} \tag{3.18a}$$

$$\langle 1 \mid 1\rangle = 1, \quad \langle 1 \mid k\rangle = 0, \quad \langle k \mid k'\rangle = \delta(k - k') \tag{3.18b}$$

非摂動 Hamiltonian と可換な射影演算子 P_0として、状態 $\mid 1\rangle$ への射影をとる、$P_0 \equiv \mid 1\rangle\langle 1 \mid$ 。すると、$P_0 V \mid k\rangle = V_k \mid 1\rangle$ より連続状態 $\mid k\rangle$ の "degree" は 1 で、次式を得る。

$$P_1 = \int dk \mid k\rangle\langle k \mid \tag{3.19}$$

P_0 に対応する補助的演算子 C_0 は (3.13′) と $d_k\rangle d_1$ より

$$\langle k \mid C_0 \mid 1\rangle = \frac{\lambda}{\omega_k - \omega_1 - i\epsilon}\langle k \mid (C_0 - P_1)V(P_0 + C_0) \mid 1\rangle$$

を満たし、結合定数λの最低次で

$$\langle k \mid C_0 \mid 1\rangle \simeq \frac{-\lambda V_k}{\omega_k - \omega_1 - i\varepsilon} \tag{3.20}$$

と与えられる。そして、対応する散逸的演算子θ_0 はλ の 2 次までで次のようになる。

$$\theta_0 = P_0 H_0 P_0 + \lambda P_0 V C_0 = \left[\omega_1 - \int dk \frac{\lambda^2 V_k^2}{\omega_k - \omega_1 - i\epsilon}\right] \mid 1\rangle\langle 1 \mid \tag{3.21}$$

同様に P_1 に対応する C_1 はλ の一次までで

$$\langle 1 \mid C_1 \mid k\rangle \simeq \frac{-\lambda V_k}{\omega_1 - \omega_k + i\varepsilon} \tag{3.22}$$

となり、θ_1は、λ^2までで

$$\theta_1 = P_1 H_0 P_1 + \lambda P_1 V C_1 \simeq \int dk\omega_k \mid k\rangle\langle k \mid - \int dk dk' \mid k'\rangle \frac{\lambda^2 V_{k'} V_k}{\omega_1 - \omega_k + i\varepsilon}\langle k \mid \tag{3.23}$$

と求まる。(3.21), (3.23) から解るように演算子θ_0, θ_1 は共に Hermite ではない。

4. 数学的構造 － rigged Hilbert 空間 －

前節の方法に従うと Liouville 演算子 L の複素スペクトル分解 (3.7) が得られる。一方、密度関数/密度行列の成す Hilbert 空間 $\mathcal{H}$上で、Liouville 演算子 L は Hermite である。つまり、複素スペクトル分解 (3.7) は Hilbert 空間 $\mathcal{H}$上では意味を持たない。しかし、具体例に見られるように、右左の固有ベクトル $F_{\alpha n}, \tilde{F}_{\alpha,n}$ と適当な Hilbert 空間の要素ϕ に対し、内積$< \phi \mid F_{\alpha n} >$ あるいは$< \tilde{F}_{\alpha n} \mid \phi >$ は意味を持ち、従って、$F_{\alpha n}, \tilde{F}_{\alpha n}$ は線型汎関数と考えることができる。事実、以下で見るように、複素スペクトル分解は、rigged Hilbert 空間、あるいは Gelfand の三つ組により正当化できる。

rigged Hilbert 空間、あるいは、Gelfand の三つ組は双対性を利用して Hilbert 空間を拡張する方法で Schwartz の超関数理論[37] の Hilbert 空間への一般化として Gelfand, Maurin ら[38, 39] により導入され、ブラ・ベクトル、ケット・ベクトルに基づく Dirac の量子論[40]の数学的基礎付に用いられた[例えば 41]。さらに、この理論を用いて、Gamov [42], 中西[35]らにより見い出だされた Hamiltonian の複素固有ベクトルに厳密な意味を与えられることも指摘されている[36, 43, 44]。複素スペクトル理論では、最初に Friedrichs のモデルに対し、[13, 14]により rigged Hilbert 空間が導入された。

4-1. rigged Hilbert 空間、一般化されたスペクトル分解

rigged Hilbert 空間による複素スペクトル分解の正当化には、1) Hilbert 空間の拡張、2) Liouville 演算子 L の拡張と固有値問題の一般化、3) スペクトル分解の一般化の三つのステップが必要である。拡張されたベクトル空間の構造はモデルにより異なる。

<u>1) Hilbert 空間の拡張</u>

Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ は双対性を利用して拡張される。まず $\mathcal{H}$の適当な部分空間（試験関数空間）Φ をとり、それが次の性質を持つとする。

1 − a) Φは Hilbert 空間の位相より強い位相をもつ。
まず、Φの点列 $\{\phi_n\}$ が、ϕ にΦの位相に関して収束する（これを$\tau_\Phi - \lim_{n\to\infty} \phi_n = \phi$）とは、通常のノルムに関する収束$\lim_{n\to\infty} \| \phi_n - \phi \| = 0$（但し、$\| \phi \| \equiv \sqrt{\langle \phi \mid \phi \rangle}$）のことではない。そして、Φ の位相について収束する点列は、ノルムに関しても収束するが、逆は必ずしも成立しない。

1 − b) Φ はそれ自身の位相について完備である。つまり、点列 $\{\phi_n\}$ が Cauchy 列、即ち、$\tau_\Phi - \lim_{\substack{n\to\infty \\ m\to\infty}} (\phi_n - \phi_m) = 0$ ならば、これはΦ 中のある要素ϕにΦの位相に関して収束する、$\tau_\Phi - \lim_{n\to\infty} \phi_n = \phi$.

1 − c) Φ は Hilbert 空間の位相に関し $\mathcal{H}$ で稠密である。つまり、$\mathcal{H}$ の任意の要素 h に対し、Φ の要素のみから成る点列 $\{\phi_n\} \subset \Phi$ が存在し、これが h に Hilbert 空間の位相について収束する、$\lim_{n\to\infty} \| \phi_n - h \| = 0$。

試験関数空間Φ の位相的反双対空間$\Phi^\dagger$ が、Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ の拡張を与える。ここで、$\Phi^\dagger$ は、試験関数空間Φ 上で定義された反線型連続汎関数の作るベクトル空間である。つまり、$\Phi^\dagger$ の要素 f は、空間Φから複素数 $\mathbf{C}$ への写像、$f : \Phi \to \mathbf{C}$ で、次の性質を満たすものである。

1 − d) 反線型性

$$f(\alpha\phi + \beta\phi') = \alpha^* f(\phi) + \beta^* f(\phi') \quad (\phi, \phi' \in \Phi, \quad \alpha, \beta \in \mathbf{C}) \tag{4.1}$$

1 − e) 連続性

$$f(\tau_\Phi - \lim_{n\to\infty} \phi_n) = \lim_{n\to\infty} f(\phi_n) \tag{4.2}$$

$\Phi^\dagger$が Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ の拡張となっていることは、以下のように示せる。$\mathcal{H}$ の任意の要素 f をとり、反線型汎関数を$\phi \mapsto \langle \phi \mid f \rangle$ で定義する。するとΦ が $\mathcal{H}$ より強い位相を持つことから、この反線型汎関数が連続であることが示せる[44]。つまり、f は$\Phi^\dagger$ に属し、その結果、$\mathcal{H} \subset \Phi^\dagger$を得る。三つ組

$$\Phi \subset \mathcal{H} \subset \Phi^\dagger \tag{4.3}$$

は rigged Hilbert 空間、あるいは、Gelfand の三つ組と呼ばれる。以下、任意の$\Phi^\dagger$ の要素 f に対し、Dirac 記法に従い、$f(\phi) \equiv \langle \phi \mid f \rangle, f^*(\phi) \equiv \langle f \mid \phi \rangle$ と表記する。

2) Liouville 演算子の拡張、固有値問題の一般化

2 − a) L の拡張、右固有ベクトル
試験関数空間Φ が Liouville 演算子の Hermite 共役 $L^\dagger$ について不変 $L^\dagger\Phi \subset \Phi$ のとき、つまり、Φの任意の要素ϕ に対し、$L^\dagger\phi$ もΦ の要素であるときに限り、Liouville 演算子 L は次式によりΦの反双対空間$\Phi^\dagger$ 上に拡張される。

$$\langle \phi \mid Lf \rangle \equiv \langle L^{\dagger}\phi \mid f \rangle \quad (f \in \Phi^{\dagger}, {}^{\forall}\phi \in \Phi) \tag{4.4}$$

反双対空間$\Phi^{\dagger}$の要素 $F_{\alpha n}$ が、ある複素数 $z_{\alpha n}$ と任意の試験関数空間Φ の要素ϕ に対し、次式を満たす時、$F_{\alpha n}$ を、固有値 $z_{\alpha n}$ に対する L の（一般化された）右固有ベクトルであると言う。

$$\langle \phi \mid LF_{\alpha n} \rangle = \langle L^{\dagger}\phi \mid F_{\alpha n} \rangle = Z_{\alpha n}\langle \phi \mid F_{\alpha n} \rangle \tag{4.5}$$

2 − b) $L^{\dagger}$ の拡張、左固有ベクトル

L の一般化された左固有ベクトルを定義するには、その Hermite 共役 $L^{\dagger}$ を拡張する必要がある。Liouville 演算子の場合には L と $L^{\dagger}$ を区別する必要はないが、他の演算子の場合にも適用できるように、ここでは両者を区別して考える。$L^{\dagger}$ を拡張するには、一般にはΦと異なる試験関数空間$\tilde{\Phi}$ が必要である。$\tilde{\Phi}$ が L に関して不変、即ち $L\tilde{\Phi} \subset \tilde{\Phi}$ のとき、任意の$\tilde{\Phi}$の要素$\tilde{\phi}$ に対する次の等式により、$L^{\dagger}$ は$\tilde{\Phi}$ の反双対空間$\tilde{\Phi}^{\dagger}$ に拡張される。

$$\langle \tilde{\phi} \mid L^{\dagger}\tilde{f} \rangle \equiv \langle L\tilde{\phi} \mid \tilde{f} \rangle \quad (\tilde{f} \in \tilde{\Phi}^{\dagger}) \tag{4.6}$$

$\tilde{\Phi}^{\dagger}$ の要素$\tilde{F}_{\alpha n}$ が、ある複素数 $z_{\alpha n}$ と任意の試験関数空間$\tilde{\Phi}$ の要素$\tilde{\phi}$ に対し次式を満たす時、これを L の固有値 $z_{\alpha n}$ に対する左固有ベクトルと言う。

$$\langle \tilde{\phi} \mid L^{\dagger}\tilde{F}_{\alpha n} \rangle = \langle L\tilde{\phi} \mid \tilde{F}_{\alpha n} \rangle = z^{*}_{\alpha n}\langle \tilde{\phi} \mid \tilde{F}_{\alpha n} \rangle \tag{4.7}$$

あるいは

$$\langle \tilde{F}_{\alpha n} \mid L\tilde{\phi} \rangle = z_{\alpha n}\langle \tilde{F}_{\alpha n} \mid \tilde{\phi} \rangle \tag{4.7'}$$

3) 一般化されたスペクトル分解

rigged Hilbert 空間の理論では左右の固有ベクトルによる完全性の条件（(3.8) の第２式）は、試験関数空間Φ 及び$\tilde{\Phi}$ の任意の要素（それぞれ$\phi, \tilde{\phi}$ とする）に対する次の等式の意味に解釈される。

$$\sum_{n=0}^{\infty} \sum\!\!\!\!\!\!\int_{\alpha} \langle \phi \mid F_{\alpha n} \rangle \langle \tilde{F}_{\alpha n} \mid \tilde{\phi} \rangle = \langle \phi \mid \tilde{\phi} \rangle \tag{4.8}$$

左辺の和/積分の収束はモデルに応じて調べる必要があり、許される試験関数空間に対する制限を与える。(4.8) が成立する時、(4.5), (4.7) より任意の$\phi, \tilde{\phi}$ に関して

$$\langle \phi \mid L \mid \tilde{\phi} \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \sum\!\!\!\!\!\!\int_{\alpha} \langle \phi \mid F_{\alpha n} \rangle z_{\alpha n} \langle \tilde{F}_{\alpha n} \mid \tilde{\phi} \rangle \tag{4.9}$$

が成立する。これが、L の一般化されたスペクトル分解である。

4-2. 複素スペクトル分解の数学的、物理的意味

この項では、rigged Hilbert 空間理論において、Hermite であった演算子が複素固有値を持ち得る理由、その物理的意味、rigged Hilbert 空間理論における半群的時間発展の生成、最後に、rigged Hilbert 空間が前二節で説明した方法のどの段階で現れるかについて説明する。

可観測量は古典力学では相空間上の実関数に、量子力学では Hermite 演算子に対応しており、前述の Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ の要素であると考えられ、可観測量 A と密度関数/ 密度行列ρ の内積 $\langle A \mid \rho \rangle$ は、A の期待値に他ならない。よって、Liouville 演算子 L の複素スペクトル分解 (4.9) は、$\mathcal{H}$ の部分空間$\tilde{\Phi}$ に属する密度関数/密度行列ρ とΦ に属する可観測量 A の次の関係式とも読める。

$$\langle A \mid L \mid \rho \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \not{\int_{\alpha}} \langle A \mid F_{\alpha n} \rangle z_{\alpha n} \langle \tilde{F}_{\alpha n} \mid \rho \rangle \tag{4.9'}$$

これより、$\tilde{\Phi}$の要素ρ に L が作用したものは、$F_{\alpha n}$ の重ね合わせ、つまり、Φ の反双対空間$\Phi^{\dagger}$ の要素である。即ち、Liouville 演算子 L は、$\tilde{\Phi}$から$\Phi^{\dagger}$ への線型写像となっている。同様にその共役は、Φから$\tilde{\Phi}^{\dagger}$ への線型写像である。従って、定義域も含めて考えると L とその共役 $L^{\dagger}$ は異なっており、L は Hermite 性を失っている。これが、Liouville 演算子 L が複素固有値を持ち得る数学的理由である。言うまでもなく、L が Hilbert 空間上で実スペクトルを持つことと、(4.9′) の意味で複素スペクトルを持つこととは矛盾しない。

(4.9′) から解るように、散逸的時間発展を特徴付ける Liouville 演算子の複素スペクトル分解は、密度関係/密度行列ρ を試験関数空間$\tilde{\Phi}$ の要素に、可観測量 A をΦ の要素に制限したときにのみ意味を持つ。この点は、粗視化と対比できる。粗視化においては、相空間のあるスケール以下の構造が観測不可能であるという制限を課すことにより、情報の不完全さが生じ、不可逆性が現れる。同様に、複素スペクトル理論においては、限られた密度関数/密度行列ρ 及び可観測量 A が時間発展の記述に用いられるため、情報の不完全さが生じ、その結果現れる不可逆性を特徴付ける時間スケールを含む複素固有値が Liouville 演算子 L に現れると考えられる。しかし、試験関数空間　$\Phi, \tilde{\Phi}$ は Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ で稠密なので、通常の粗視化より人為的要素は少ない。

Friedrichs のモデル[13,14]やパイこね変換[19]では、試験関数空間$\Phi, \tilde{\Phi}$ が時間発展に対し非対称にふるまう。

$$U(t)\tilde{\Phi} \subset \tilde{\Phi} \quad , \quad U(-t)\tilde{\Phi} \not\subset \tilde{\Phi} \tag{4.10a}$$

$$U(t)\Phi \not\subset \Phi \quad , \quad U(-t)\Phi \subset \Phi \tag{4.10b}$$

ここで t は正で、$U(t)$ は、時刻0 から t までの時間発展のユニタリー演算子で、Hamiltonian 系では Liouville 演算子で L を用いて $U(t) = \exp(-iLt)$ と表される。このことから、反双対空間$\Phi^{\dagger}, \tilde{\Phi}^{\dagger}$上に拡張

された時間発展が半群の性質を持つことが解る。事実、$\Phi^\dagger$ の任意の要素 f とΦの任意の要素 A に対し、

$$\langle A \mid U(\tau) \mid f\rangle \equiv \langle U^\dagger(\tau)A \mid f\rangle = \langle U(-\tau)A \mid f\rangle \tag{4.11}$$

が成立し、(4.10b) より、これは$\tau > 0$ のときのみ意味を持つ。つまり、拡張された空間$\Phi^\dagger$ 上では、正方向の時間発展のみが定義される。さらに、次式より $U(\tau)$ が半群の性質を持つことが解る。

$$\langle A \mid U(\tau)U(\tau') \mid f\rangle = \langle U(-\tau')U(\tau)A \mid f\rangle = \langle U(-\tau-\tau')A \mid f\rangle = \langle A \mid U(\tau+\tau') \mid f\rangle \tag{4.12}$$

同様にもう一方の拡張された空間$\tilde{\Phi}^\dagger$ 上では、$U(\tau)$ は、逆方向の時間発展半群を与える。この意味で、時間発展は拡張された関数空間上で不可逆性を持つ。一般的証明はないが、以上の性質は、複素スペクトル理論が適用できる系で常に成立していると期待される。

最後に、前二節の形式論のどこに rigged Hilbert 空間が必要とされるかを論じる。第2節の議論では、Liouville 演算子 L の複素固有値は、本来、複素平面の上半平面で定義された演算子 $1/(z-\hat{\psi}(z))$ ((2.5−8) 式参照）を下半平面に解析接続することにより得られている。しかし、演算子の解析接続は限られた行列要素についてしか可能でない。つまり、この操作を正当化するには、行列要素を作るのに用いる Hilbert 空間の要素に制限を加える必要があり、これは、試験関数空間の導入と等価である。第3節で説明した補助的演算子 C_n, D_n の方程式 $(3.13-14')$ は、L_0 の固有値の共鳴に対応する “小さな分母” を含んだ無限級数を与える。この級数は、通常の Hilbert 空間の位相では収束せず、これに意味を与えるには、限られた Hilbert 空間の要素に対応する行列要素の意味での収束と考える必要がある。この点で、試験関数空間が導入されるのである。

5. 結語

通常、一般化されたマスター方程式に対して適当な近似をすることにより、不可逆な時間発展の方程式が得られる。このアプローチでは、不可逆性の原因を近似の操作に帰することができ、近似の精度を上げると最終的に不可逆な方程式は可逆な方程式に帰着してしまうと考えがちである。しかし、第2節で見たように、方程式の持つ不可逆な要素を保持する厳密な理論を組み立てることができる。第3、第4節で論じた複素スペクトル理論はこのような理論である。Hamiltonian 系の場合、非摂動 Liouville 演算子 L_0 の固有値に共鳴（縮退）がないと第3節の摂動法は、通常の摂動論に帰着し、Liouville 演算子 L は実スペクトルを持つ。L が複素スペクトルを持つには、L_0 の固有値に共鳴（縮退）が必要である。特に第3節で述べた方法が適用できるには、共鳴に関与する L_0 の固有値の少なくとも一つが、連続スペクトルに属している必要がある。このような系、つまり、連続スペクトルを持ち、共鳴が必ず連続スペクトルに関与して現れる系を Large Poincaré 系と呼んでいる[1−14]。

複素スペクトル理論では、Liouville 演算子 L が、部分的自由度に対応する散逸的演算子θ_n と結びつけられていることから、L の複素スペクトル分解が得られる。しかし、Hermite 演算子の複素固有関数

という考えは新しいものではない。既に、α 崩壊の理論で Gamov [42]が Lee-Friedrichs のモデルで中西[35] が、Hamiltonian の複素固有状態を構築している。また、Hermite な演算子の複素スペクトル分解、同様に、ユニタリー演算子の絶対値が1より小さい固有値を与える理論も既にいくつか提案されている。Combes ら[45]によって提案された複素スケーリングの理論[46]では、Hamiltonian H に座標のスケール変換 $H_\alpha \leftleftarrows U(\sigma)HU^{-1}(\sigma)$ が施される。ここで $U(\sigma)$ は実パラメータσに依存するスケール変換の演算子である。適当な仮定の下で、H_σ がパラメータσについて解析的であることが示せる。σ の複素数値に対応する H_σ は Hermite 的でなく、その連続スペクトルは複素平面内の曲線上にあり、量子共鳴状態は複素固有値に対応する H_σ の proper な固有ベクトルとして記述される。H_σのスペクトル分解を $U(\sigma)$ を用いてもとの Hamiltonian H に戻すとこれは、H の複素スペクトル分解となっている。Sudarshan らによる状態ベクトルの解析接続理論[36,47]では、連続固有ベクトルを指定するエネルギー変数が、複素平面内の曲線まで解析接続される。この結果、例えば、エネルギー変数 E について対角的な非摂動 Hamiltonian H_0 は以下のように変形される。

$$H_0 = \int_0^\infty dE \mid E\rangle\langle E \mid \quad \rightarrow \quad H_0 = \int_\Gamma d\zeta \mid \zeta\rangle\langle\zeta \mid$$

ここで、Γ は0から出発し無限遠までのびている下（上）半平面内の曲線で、ζ はΓ 上の変数で、$\mid \zeta\rangle, \langle\zeta \mid$ はそれぞれ $\mid E\rangle$ 及び $\langle E \mid$ のΓ への解析接続である。$\langle\zeta \mid$ が $\mid \zeta\rangle$ の Hermite 共役でないことに注意しておく。この操作により、系の Hamiltonian は、複素平面の曲線Γ に依存する演算子 H_Γ に変形される。H_Γ は、Γ 上に連続スペクトルを、量子共鳴状態を孤立複素固有値に対応する固有ベクトルとして持つ。H_Γ のスペクトル分解に前述の逆の操作を施すことにより Hamiltonian の複素スペクトル分解が得られる。Bohm らによる理論[43,44] では、外向き、内向きの散乱状態（それぞれ$\phi_E^{\rm out}, \phi_E^{\rm in}$）が存在する系を扱い、$S$行列要素 $S(E)$ の重みをもつ Hamiltonian H のスペクトル分解

$$H = \int_0^\infty dE \mid \phi_E^{\rm in}\rangle ES(E)\langle\phi_E^{\rm out} \mid$$

から出発する。適当な rigged Hilbert 空間を考えることにより、$\mid \phi_E^{\rm in}\rangle, \langle\phi_E^{\rm out} \mid$ を E について下半平面で解析的であるようにすることができる。上式の積分路を$[0, +\infty)$ から下半平面を通って $(-\infty, 0]$ に変形することにより、S行列 $S(E)$ の下半平面での極を孤立固有値に、$(-\infty, 0]$ を連続固有値として持つ H の複素スペクトル分解が得られる。Friedrichs のモデルに対しては、以上の理論は複素スペクトル理論と同等の結果を与える。Pollicott [48], Ruelle[49]らは Axiom A 系等のエルゴード的系の相関関数の減衰率を、密度関数の時間発展の演算子 (Frobenius-Perron 演算子) の固有値 (Pollicott-Ruelle の共鳴) として特徴付ける理論を展開している。この理論では、適当な Hilbert 空間上でユニタリーな Frobenius-Perron 演算子が、絶対値が1より小さい固有値を持ち、対応する固有関数は、Schwartz の超関数となる。もとの Hilbert 空間、超関数空間、そして、対応する試験関数空間の組は、rigged Hilbert 空間の一例である。一方、複素スペクトル理論は、一次元、二次元のマップの Frobenius-Perron 演算子のスペクトル分解にも適用されており[15−20]、一次元の r-adic マップ、二次元のパイこね変換では、離散的固有値のみを含むスペクトル分解が得られている。これらの例では、固有値は Pollicott-Ruelle の共鳴と一致している。

これらの理論に対し、複素スペクトル理論は、非平衡統計力学理論から発展しており、摂動論的方法に大きく、依存している。このため、複素スペクトル理論は、Hermite 演算子の複素固有値に厳密な基礎付けを与えるばかりでなく、通常の不可逆な方程式を導く近似法（量子光学における Born-Markov 近似等）に系統的な視点を与える。

最後に、不可逆な時間発展を主張する熱力学の第二法則の力学的解釈に言及する。周知のように、Boltzmann 以来熱力学の第二法則に力学的解釈を与えることは何度も試みられてきたが、最終的な解答はまだ得られていない。前節で見てきたように複素スペクトル理論では、系の記述に用いられる密度関数/密度行列と可観測量に制限を課すことにより、時間発展を記述する Liouville 演算子 L の複素スペクトル分解が得られる。さらに、制限のつけ方に依り、時間発展は未来へ向かう半群、あるいは過去へ向かう半群となる。従って、仮に自然界で実現可能な密度関数/密度行列及び可観測量が限られている、つまり、この制限がある種の自然法則であるとすれば、一方向の時間発展、即ち、不可逆な時間発展が自然に得られる。このようなアプローチも次の理由から一考に値するだろう。第一に、密度関数/密度行列や可観測量に対する制限は、粗視化と違い相空間に観測可能な最小のスケールが存在することを必要としない。実際、これは相空間上で定義された関数の性質に対する制限で相空間そのものに対する制限ではない。第二に、実現される物理的対象に数学的な量を対応させる際、必ず有限個の情報からの外挿が行われており、このため、密度関数/密度行列や可観測量を Hilbert 空間の稠密な部分空間に限っても、実際上制限を加えていることにはならない。事実、有限個のデータから対応する Hilbert 空間の要素を構築する際に生じる誤差の範囲で稠密な部分空間の要素を必ず捜すことができる。このコメントは Bohm[50] による。最後に、熱力学の第二法則は，第二種永久機関の不可能性にみられるように制限を表す法則であり、密度関数/ 密度行列や可観測量に対して制限を加えることと矛盾しない。しかし、希薄気体等の具体的系における制限の性質、それと熱力学的エントロピーの関係については、今後の研究が必要である。

謝 辞

本稿は、東京工業大学、京都大学基礎物理学研究所、基礎化学研究所で行ったセミナーの原稿に加筆したもので、その機会を設けてくれた、北原和夫教授（東工大）、池田研介教授（基礎物理研）、福井謙一教授（基礎化学研所長）の各氏に感謝する。本稿を準備するにあたっては、共同研究者の Prof. I. Prigogine, Dr. I. Antoniou, 各セミナーへの参加者、相沢洋二教授（早稲田大学）を始めとする国際シンポジウム「量子物理学と宇宙」(早稲田大学、１９９２年８月）の参加者との議論に負うところが非常に大きい。これらの方々にも謝意を表したい。

References

1. T.Y. Petrosky and I. Prigogine, Physica A 147 (1988) 439;
   I. Prigogine and T.Y. Petrosky *ibid.* 461.
2. T. Petrosky and H. Hasegawa, Physica A 160 (1989) 351.
3. T. Petrosky and I. Prigogine, Physica A 175 (1991) 146.
4. I. Prigogine, T. Petrosky, H. Hasegawa and S. Tasaki, Chaos, Solitons and Fractals 1 (1991) 3.
5. I. Prigogine and T. Petrosky, in Proceedings of the 2nd Int. Wigner Symposium, July 15 - 20 (1991), eds. H. Doebner, F. Schroeck.
6. I. Prigogine, the XXth Solvay Conference, November 5 - 9 (1991), eds. P. Mandel, Phys. Rep. 219 (1992) 93.
7. T. Petrosky, in Proceedings of "Foundation of Quantum Mechanics", edited by M. Scully (1992).
8. T. Petrosky and I. Prigogine, in *Research Trends in Physics: Chaotic Dynamics and Transport in Fluids and Plasma*, American Institute of Physics, New York (1993) in press.
9. I. Prigogine, in Proceedings of "Quantum Physics and the Universe", eds. by M. Namiki, Waseda University, Tokyo, 19-21 Aug. 1992.
10. T. Petrosky and I. Prigogine, in Proceedings of "Quantum Physics and the Universe", eds. by M. Namiki, Waseda University, Tokyo, 19-21 Aug. 1992.
11. I. Antoniou and S. Tasaki, Int. J. Quantum Chem. 45 (1993) in press.
12. T. Petrosky, I. Prigogine and S. Tasaki, Physica A 173 (1991) 175.
13. I. Antoniou, in Proceedings of the 2nd Int. Wigner Symposium, July 15 - 20 (1991), eds. H. Doebner, F. Schroeck.
14. I. Antoniou and I. Prigogine, Physica A 192 (1993) 443.
15. H. Hasegawa and W. Saphir, in *Solitons and Chaos* pp.192 - 200, eds. I. Antoniou and F. Lambert, Springer, Berlin (1991).
16. H. Hasegawa and W. Saphir, Physics Letters A162 (1992) 471 ; *ibid* 477.
17. H.H. Hasegawa and D.J. Driebe, Physics Letters A 168 (1992) 18.
18. H.H. Hasegawa and W.C. Saphir, Physical Review A 46 (1992) 7401.
19. I. Antoniou and S. Tasaki, Physica A 190 (1992) 303.
20. I. Antoniou and S. Tasaki, J. Phys. A: Math. Gen. 26 (1993) 73.
21. I. Prigogine, *From Being to Becoming*, Freeman, New York (1980).
22. I. Prigogine, C. George and F. Henin, Physica 45 (1969) 418.
23. I. Prigogine, C. George, F. Henin and L. Rosenfeld, Chemica Scripta 4 (1973) 5.
24. A. Grecos, T. Guo and W. Guo, Physica 80 A (1975) 421.
25. C. George, Physica 65 (1973) 277.
26. C. George, F. Mayné and I. Prigogine, Adv. Chem. Phys. 61 (1985) 223.
27. C. George and F. Mayné, J. Stat. Phys. 48 (1987) 1343.
28. R. Kubo, J. Phys. Soc. Jpn. 12 (1957) 570.
29. M. Toda, R. Kubo and N. Saito, *Statistical Physics I*, Solid-State Sciences 30, Springer, Berlin (1983);
    R. Kubo, M. Toda and N. Hashitsume, *Statistical Physics II*, Solid-State Sciences 31, Springer, Berlin (1985).

30. R.C. Tolman, *The Principles of statistical Mechanics*, Oxford Univ. Press, Oxford (1938); Dover, New York (1979).
31. S. Nakajima, Prog. Theor. Phys. 20 (1958) 948;
R. Zwanzig, J. Chem. Phys. 33 (1960) 1338;
H. Mori, Prog. Theor. Phys. 33 (1965) 424.
32. I. Prigogine, *Non-Equilibrium Statistical Mechanics*, Wiley, New York (1962).
33. L. Lanz and L.A. Lugiato, Physica 44 (1969) 532;
A. Grecos, Physica 51 (1970) 50.
34. K.O. Friedrichs, Commun. Pure Appl. Math. 1 (1948) 361;
T.D. Lee, Phys. Rev. 95 (1954) 1329.
35. N. Nakanishi, Prog. Theor. Phys. 19 (1958) 607.
36. E.C.G. Sudarshan, C. Chiu and V. Gorini, Phys. Rev. D18 (1978) 2914;
V. Gorini and G. Parravicini, in "Group Theor. Methods in Physics", ed. by A. Bohm et als., Springer Lect. Notes in Physics 94 (1979) 219;
G. Parravicini, V. Gorini and E.C.G. Sudarshan, J. Math. Physics 21 (1980) 2208.
37. L. Schwartz, *Theorie des Distributions I,II*, Hermann, Paris, (1957,1959).
38. I. Gelfand and G. Shilov, *Generalized Functions* Vol.3, Academic Press, New York (1967);
I. Gelfand and N. Vilenkin, *Generalized Functions* Vol.4, Academic Press, New York (1964).
39. K. Maurin, *General Eigenfunction Expansion and Unitary Representations of Topological Groups*, Polish Sci. Publ., Warsaw (1968).
40. P.A.M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*, Oxford Univ. Press, London (1958).
41. A. Bohm, *The Rigged Hilbert Space and Quantum Mechanics*, Springer Lect. Notes in Physics 78, Berlin (1978);
A. Bohm, *Quantum Mechanics: Foundations and Applications*, 2nd ed. Springer, Berlin (1986).
42. G. Gamov, Z. Physik 51 (1928) 204.
43. A. Bohm: Lett. Math. Physics 3 (1979) 455;
A. Bohm, M. Gadella and G. Bruce Mainland: Am. J. Phys. 57 (1989) 1103.
44. A. Bohm and M. Gadella, *Dirac kets, Gamow vectors and Gelfand triplets*, Springer Lect. Notes in Physics 348, Berlin (1989).
45. J. Aguilar and J.M. Combes, Commun. Math. Phys. 22 (1971) 269;
E. Balslev and J.M. Combes, *ibid* p.280.
46. For recent references, see *Resonances*, E. Brändas and N. Elander eds., Springer Lect. Notes in Physics 325, Berlin (1989).
47. E.C.G. Sudarshan and C.B. Chiu, "Analytic continuation of quantum systems and their temporal evolution", to be published in Phys. Rev. (1993).
48. M. Pollicott, Invent. Math. 81 (1985) 413; Am. Math. 131 (1990) 331.
49. D. Ruelle, Phys. Rev. Lett. 56 (1986) 405; J. Diff. Geom. 25 (1987) 117; Commun. Math. Phys. 125 (1989) 239.
50. A. Bohm, personal communication.